

超薄膜磁性材料上 XY 模型的临界现象^{*}

王 漪¹⁾ 韩汝琦¹⁾ 刘晓彦¹⁾ 崛口刚²⁾

¹⁾ 北京大学微电子学研究所, 北京 100871)

²⁾ 东北大学计算机科学系, 日本仙台 980-8579)

(2002 年 5 月 26 日收到, 2002 年 11 月 18 日收到修改稿)

采用经典 XY 模型, 阐明了三角格子上层状超薄膜磁性材料的相变和临界现象. 并用 Monte-Carlo 方法对该模型的内部能量、比热、chirality 等热力学量进行了计算. 使用 finite-size scaling 分析法对临界现象的性质进行了论述. 通过上述分析和计算, 发现该模型在反强磁性层与强磁性层内的 chirality 在一定范围内随温度的变化急剧增加, 这是一种新的 chirality 相变, 而在另一范围内存在 Kosterlitz-Thouless 相变和通常的 chirality 相变. 这种新的 chirality 相变的临界系数与系统层数增加无关, 而通常的 chirality 相变的临界系数随系统层数增加而增加.

关键词: 层状 XY 模型, 临界现象, Monte-Carlo 模拟, 磁性薄膜

PACC: 7510H, 0570J, 7115Q, 7540C

1. 引言

近年来, 随着薄膜制造技术的日趋完善, 为制造高性能、高质量的超薄磁性薄膜开创了新途径. 由于多层磁性薄膜在高密度磁头、磁存储元件以及薄膜传感器上有广泛的应用前景, 故使各种超薄磁性薄膜的研制和应用受到科学家的瞩目. 用统计物理学方法以及从微观的电子自旋模型出发对超薄膜磁性材料的相变和临界现象以及其物理性质进行研究, 这对新器件和新材料的开发与研制具有重要意义. 目前对层状磁性材料、超薄膜磁性材料的研究主要是以 Ising 模型^[1-3]以及三维立方体系统^[4-8]为主, 但对二维层状经典 XY 模型和 Heisenberg 模型的研究报道甚少. 因此对二维层状经典 XY 模型和 Heisenberg 模型相变及临界现象的物理性质和普遍性进行研究非常重要. 为此本文对二维层状经典 XY 模型超薄膜磁性材料的相变及临界现象进行了研究. 尤其对层与层之间的相互作用强度是强磁性、反强磁性以及三明治式反强磁性-强磁性-反强磁性模型的内部能量、比热、chirality 等物理量用 Monte-Carlo 数值模拟进行了计算, 并对其结果用 finite-size scaling 分析法进行解析, 获得相关的临界系数. 分析了层状超薄膜磁性材料层与临界系数的关系, 并对其

相变性质进行精确计算和详细论述.

2. 层状 XY 模型与基态的计算

2.1. 层状 XY 模型

考虑三角格子上超薄膜磁性材料的 2 层、3 层、4 层 XY 模型. 最底层三角格子为 Λ_1 , 其次三角格子分别为 Λ_2, Λ_3 , 最上层三角格子为 Λ_4 , 所以该系统总的格子为

$$\Lambda = \Lambda_1 + \Lambda_2 + \Lambda_3 + \Lambda_4. \quad (1)$$

考虑自旋阵点与最邻近阵点之间的交换相互作用, 则系统的哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned} H = & -I \sum_{\langle ij \rangle} s_i \cdot s_j - J \sum_{\langle ij \rangle} t_i \cdot t_j \\ & - K \sum_{\langle ij \rangle} u_i \cdot u_j - L \sum_{\langle ij \rangle} v_i \cdot v_j \\ & - P \sum_i s_i \cdot t_i - Q \sum_i t_i \cdot u_i \\ & - R \sum_i u_i \cdot v_i, \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\langle ij \rangle$ 为各层层内最近邻间求和, i 为层与层之间对应点的求和, $i \in (\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3, \Lambda_4)$. 系统选取周期性边界条件以消除边界效应对模拟计算结果的影响. 系统的大小为 $N = |\Lambda_1| = |\Lambda_2| = |\Lambda_3| = |\Lambda_4|$

^{*} 国家教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

[†] E-mail: wangyi@ime.pku.edu.cn

$= N_l \times N_l$. 系统总的格子点数为层数 $\times N$. 各层层内的最邻近交换常数分别用 I, J, K, L 表示. 层与层之间的交换常数分别用 P, Q, R 表示, $P \in (\Lambda_1, \Lambda_2), Q \in (\Lambda_2, \Lambda_3), R \in (\Lambda_3, \Lambda_4)$. 符号 $s_i, s_j, t_i, t_j, u_i, u_j, v_i, v_j$ 分别为各层内阵点 i, j 的自旋, 各层自旋可表示为

$$s_i = (\cos\theta_i, \sin\theta_i), \quad t_i = (\cos\theta_i, \sin\theta_i),$$
$$u_i = (\cos\phi_i, \sin\phi_i), \quad v_i = (\cos\omega_i, \sin\omega_i). \quad (3)$$

当(2)式中交换常数 K, L, Q, R 取零时, 为 2 层模型; 当交换常数 L, R 取零时, 为 3 层模型; 当所有交换常数都不为零时, 则为 4 层模型.

系统的基态能量及其他热力学量满足:

$$\Gamma(I, J, K, L, P, Q, R)$$
$$= \Gamma(I, J, K, L, \pm P, \pm Q, \pm R). \quad (4)$$

以 2 层模型为例, 当 $P > 0$ 时, 自旋为 $\{s_i, t_i | i = 1, 2, \dots, N\}$; 当 $P < 0$ 时, 自旋为 $\{-s_i, t_i | i = 1, 2, \dots, N\}$ 和 $\{s_i, -t_i | i = 1, 2, \dots, N\}$. 所以 $\{s_i, t_j\}$ 与 P 为正时一致. (4) 式成立. 在以下的计算中取 P, Q, R 为正, 可保证热力学量的一般物理性质不变.

2.2. 基态的计算

随着层数的增加, 系统独立变量的数也在增加. 即使考虑三角形的对称性, 减少系统独立变量的数量, 用直接的数值方法对系统基态进行计算是不可能的. 我们采用 4 个重叠三角形单元来计算系统的基态. 在此三角形单元的能量最小时, 各层内阵点自旋所取角度与之对应的能量为系统的基态能量. 4 个重叠三角形单元的能量可表示为 e , 即

$$e = - [\cos(\theta_1 - \theta_2) + \cos(\theta_2 - \theta_3) + \cos(\theta_3 - \theta_1)]$$
$$- [\cos(\phi_1 - \phi_2) + \cos(\phi_2 - \phi_3) + \cos(\phi_3 - \phi_1)]$$
$$- K [\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos(\varphi_2 - \varphi_3) + \cos(\varphi_3 - \varphi_1)]$$
$$- L [\cos(\omega_1 - \omega_2) + \cos(\omega_2 - \omega_3) + \cos(\omega_3 - \omega_1)]$$
$$- \tilde{P} [\cos(\theta_1 - \theta_1) + \cos(\theta_2 - \theta_2) + \cos(\theta_3 - \theta_3)]$$
$$- \tilde{Q} [\cos(\phi_1 - \phi_1) + \cos(\phi_2 - \phi_2) + \cos(\phi_3 - \phi_3)]$$
$$- \tilde{R} [\cos(\varphi_1 - \varphi_1) + \cos(\varphi_2 - \varphi_2) + \cos(\varphi_3 - \varphi_3)], \quad (5)$$

式中 $\tilde{P}, \tilde{Q}, \tilde{R}$ 与(2)式的关系为 $\tilde{P} = P/3, \tilde{Q} = Q/3, \tilde{R} = R/3$. 分别对式中的变量 $\theta, \phi, \varphi, \omega$ 求导, 然后使其斜率为极小值时, 角度 $\theta, \phi, \varphi, \omega$ 所对应的能量为基态能量^[9]. 在 $I = L, J = K, P = Q = R = 1$ 时基态的相图如图 1 所示. 基态的相图分为 F, C, V1, V2 4 个区域, 在 F 内各层阵点自旋所取角度 $\theta_i = \phi_i =$

$\varphi_i = \omega_i$ 为取向相同的强磁性. 在 C 内各层阵点自旋所取角度 $\theta_i = \phi_i = \varphi_i = \omega_i$ 取向为 120° . V1 和 V2 是两个不完整的构造, 所有角度随交换常数而变化. 2 层模型^[10]和 3 层模型^[11]都有相同的结构.

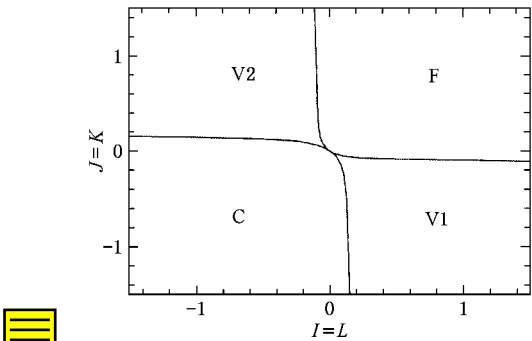


图 1 $I = L, J = K, P = Q = R = 1$ 时 I - J 平面上的基态相图

3. Monte-Carlo 数值模拟

对于靠近基态边界区, 系统相关参数所表示的系统在有限温度下的相变是本文研究的重点之一. 以四层模型为例, 系统相关参数设定为 $I = L = -1, P = Q = R = 1, J = K > 0$, 即基态相图(图 1)中 V2-C 区域进行数值计算. Monte-Carlo 数值模拟系统大小为 $N = N_l \times N_l, N_l = 24, 36, 48$. 对于系统的整体性质和温度变化参数平面的关系图, 我们都使用 $N_l = 24$ 进行计算. 在 Monte-Carlo 数值模拟时系统的自旋初始状态由一组随机的自旋状态来表示. 物理量 A 的 Monte-Carlo 平均 $\langle A \rangle$ 由(6)式计算.

$$\langle A \rangle = \frac{1}{n - n_0} \sum_{t=n_0+1}^n A(t). \quad (6)$$

用(6)式计算时选用两组数值进行计算, $n_0 = 2.5 \times 10^5$ Monte-Carlo steps (MCSS), $n = 5 \times 10^5$ MCSS 和 $n = 5 \times 10^5$ MCSS, $n = 10^6$ MCSS.

本文中玻尔兹曼常数取定为 $k = 1$. 系统的内部能量由(7)式计算,

$$E = \frac{1}{4N} \langle H \rangle, \quad (7)$$

比热由(8)式计算,

$$C = \frac{1}{4NT^2} \{ \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 \}. \quad (8)$$

chirality 由每个平面上三角元素中最小三角形所给出. 在平面 Λ_1 中 chirality κ_{ijk}^s 由(9)式给出^[12],

$$\kappa_{ijk}^s = \frac{2}{3\sqrt{3}} (s_i \times s_j + s_j \times s_k + s_k \times s_i) \cdot \hat{e}_z$$

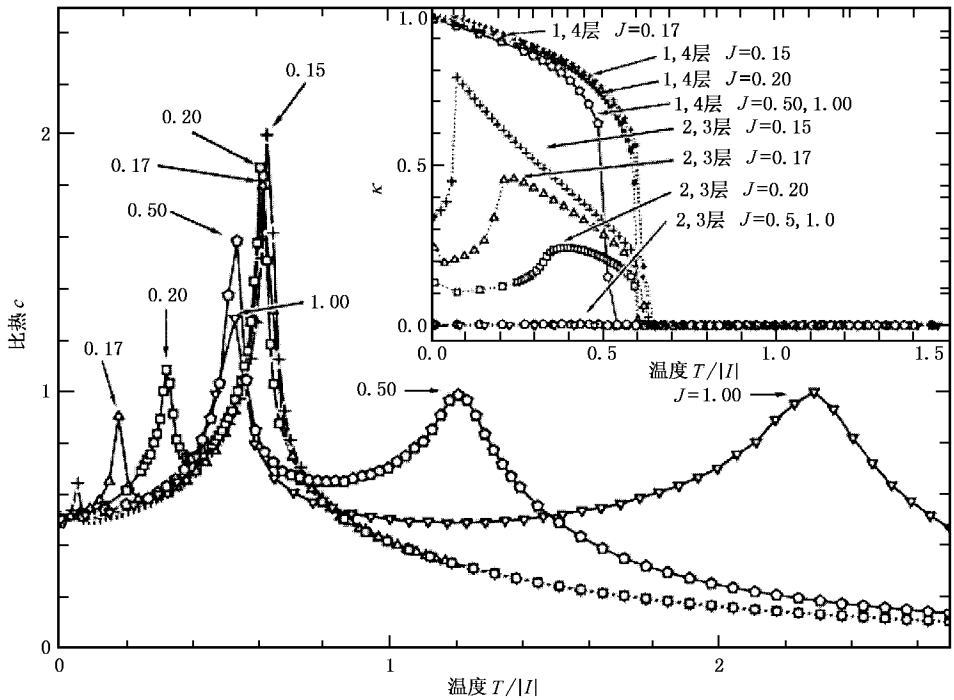


图2 $I = L = -1, J = K, P = Q = R = 1$ 时温度与比热的关系曲线及温度与 chirality(κ)的关系曲线 系统大小 $N_t = 24$

$$= \frac{2}{3\sqrt{3}}[\sin(\theta_j - \theta_i) + \sin(\theta_k - \theta_j) + \sin(\theta_i - \theta_k)],$$
 (9)

式中 \hat{e}_z 为自旋空间内 z 分量的单位矢量,下标 $\{i, j, k\}$ 为在 Δ_1 平面上方向向上三角形的逆时针顺序三个坐标格点的标记.用相同的方法可计算 $\Delta_2, \Delta_3, \Delta_4$ 平面上的 chirality $\kappa_{ijk}^i, \kappa_{ijk}^u, \kappa_{ijk}^v$.整个系统 chirality 的平均可由(10)式计算,

$$\kappa = \frac{1}{4}(\kappa_s + \kappa_l + \kappa_u + \kappa_v),$$
 (10)

式中

$$\kappa_s = \frac{1}{N} \sum_{\langle ijk \rangle} \langle \kappa_{ijk}^s \rangle,$$
 (11)

式中求和为 Δ_1 平面上方向向上三角形元素全部的和.用相同的方法可计算(11)式中的 $\kappa_l, \kappa_u, \kappa_v$.

系统的内部能量 E 在交换常数 $J = 0.15, 0.20, 0.50, 1.00$ 时内部能量 E 与温度 T 的关系曲线显示出,交换常数 J 在温度 $T = 0.7$ 附近 E 有急剧变化.为了进一步研究这一变化过程,我们对系统的比热进行了计算.结果如图2所示.图2中交换常数 $J = 0.15$ 时(+)所示的系统比热有两个较尖锐的峰.一个所对应的温度在 $T = 0.7$ 附近;另一个所对应的温度在 $T = 0.06$ 附近.通过对交换常数 J 小于 0.15

的系统比热进行计算,发现交换常数 J 在小于 0.14 时,系统的比热只有一个峰值,它所对应的温度在 $T = 0.7$ 附近.而 $J = 0.14$ 时在基态相图(图1)中是 V_2 与 C 区域的交界处,所以交换常数 J 在小于 0.14 时系统各层阵点自旋所取角度均为 120° ,此种情况下只有一种结构,相变也只有一种,这与 Monte-Carlo 数值模拟的计算结果一致.交换常数 J 在大于 0.14 时系统在 V_2 区,从图1可知 V_2 区有两个不完整的构造,最上层与最下层(1,4层)为反强磁性,中间两层(2,3层)为强磁性.随着中间层交换常数 J 的增大,中间层的强磁性也逐渐增大,系统的整体磁性也会发生变化,有限温度所对应的比热有两个峰值.通过对不同交换常数 J 所对应的系统比热进行计算,我们发现交换常数在 $0.14 < J < 0.26$ 时比热有两个较尖锐的峰,在 $J > 0.26$ 时两个峰一个较尖锐而另一个较平缓.在 $0.14 < J < 0.26$ 时比热的两个较尖锐峰值所对应的温度一个在 $T = 0.7$ 附近而另一个则低于 $T = 0.7$.在 $J > 0.26$ 时两个峰值一个在 $T = 0.7$ 附近而另一个则高于 $T = 0.7$.系统比热的较尖锐峰值大小依赖于系统大小 N_t ,较平缓的峰值大小不依赖于系统大小 N_t ^[10].对于不依赖于系统大小较平缓的峰值,我们认为此峰值所对应的相变为 Kosterlitz-Thouless(KT)相变^[13].本文主要研究较尖

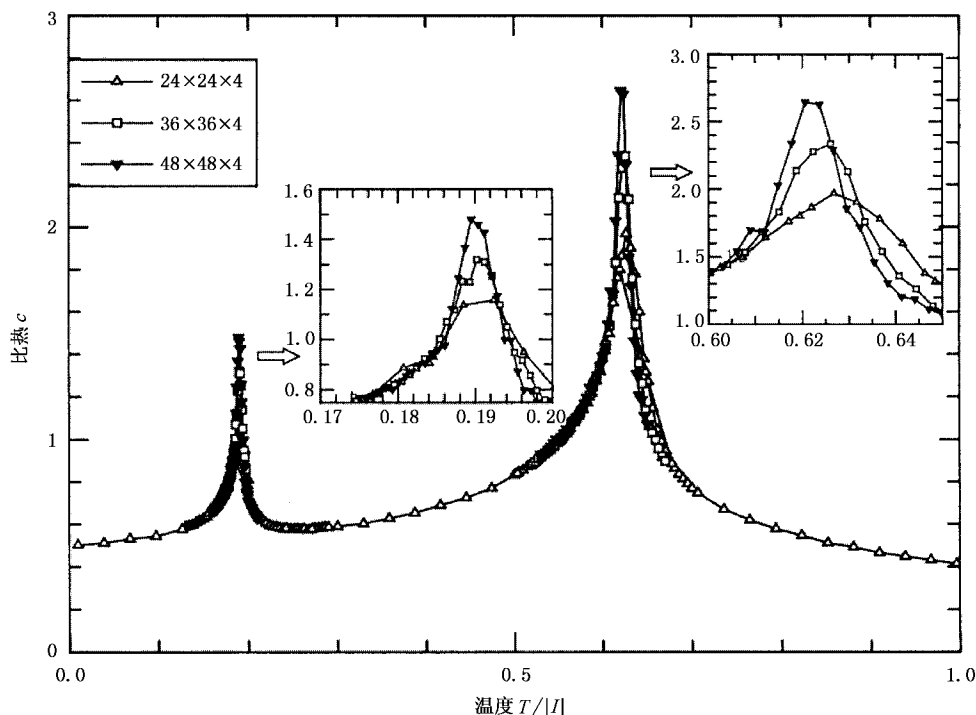


图3 $I = L = -1, J = K = 0.17, P = Q = R = 1$ 时温度与比热的关系曲线及比热与系统大小的依赖性 系统大小 $N_l = 24, 36, 48$

锐峰值所对应的相变及其所对应的临界系数和相变的性质,为此计算了每个平面上的 chirality.

系统的 chirality(κ) 在交换常数 $J = 0.15, 0.17, 0.20, 0.50, 1.00$ 时每个平面上的 chirality(κ) 与温度 T 的关系曲线如图 2 内插图所示. 在交换常数 $J = 0.5, 1.0$ 时中间两层为强磁层, chirality 为零. 在 $0.14 < J < 0.26$ 时, 系统每一层的 chirality 都是连续变化. 在 $J > 0.26$ 时, 两个反强磁层的 chirality 也是连续变化, 其变化温度为 T_u . 在温度小于 T_u 时, 强磁层的 chirality 在一定的温度范围内随温度的升高而急剧增大, 此温度为 T_l , 它与系统的比热在低温处一个较尖锐峰值所对应的温度一致. 通过对 chirality 的计算, 我们认为交换常数 J 在小于 0.14 时, 相变为 chirality 相变^[12, 14]. 在 $0.14 < J < 0.26$ 时, 两个相变为 chirality 相变. 在 $J > 0.26$ 时, 两个相变一个为 chirality 相变, 另一个为 KT 相变.

4. 计算结果与讨论

为了精确地计算交换常数 J 在 $0.14 < J < 0.26$ 时的临界系数和进一步研究其相变性质, 我们选取 $J = 0.17, N_l = 24, 36, 48$ 对系统的比热及 chirality 进

行了计算, 并使用 finite-size scaling 分析法^[15] 对温度 T_u 和 T_l 处的比热和 chirality 进行分析计算, 求出了临界系数 α, β, ν .

$J = 0.17$ 时系统比热 c 与温度 T 的关系曲线如图 3 所示. 从图 3 可明显地看出系统的比热 c 在温度 T_u 和 T_l 处, 比热 c 的大小与系统的大小 N_l 有很强的相关性. 温度选定为 $T_u = 0.6186 \pm 0.001, T_l = 0.1899 \pm 0.001$, 选取方法采用外插与 Binder 参数^[9, 16]. 对应于温度 T_u , 系统比热及 chirality 的 finite-size scaling 分析法计算结果如图 4 和图 5 所示. 系统的临界系数 α, β, ν 分别为 $(\alpha \ln), 0.198 \pm 0.002$ 和 0.96 ± 0.05 . 对应于温度 T_l , 系统比热及 chirality 的 finite-size scaling 分析法计算结果如图 4 和图 5 内插图所示. 临界系数 β 由 (12) 计算,

$$\kappa_f \propto \kappa_f^{(c)} - a(T_{cl} - T)^\beta \quad (T \leq T_{cl}), \quad (12)$$

式中 $\kappa_f^{(c)}$ 为强磁层内 chirality κ_f 的最大值, a 为常数. 此时系统的临界系数 α, β, ν 分别为 $0.29 \pm 0.05, 0.25 \pm 0.02$ 和 0.86 ± 0.03 .

在 $0.14 < J < 0.26$ 时, 系统比热所对应的相变是两个不同的二维系统的 chirality 相变, 其中低温区域相变是一种新的 chirality 相变, 高温区域相变是一般的 chirality 相变. 低温区域的相变是幂级数发

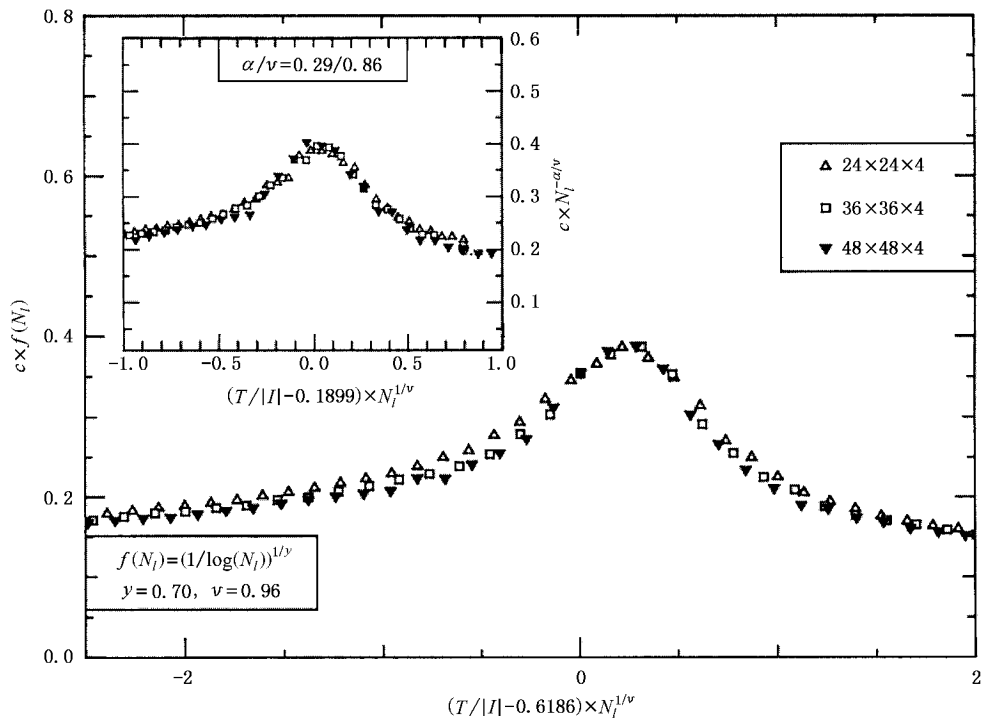


图4 $I = L = -1, J = K = 0.17, P = Q = R = 1$ 时温度与比热 finite-size scaling 分析法的结果

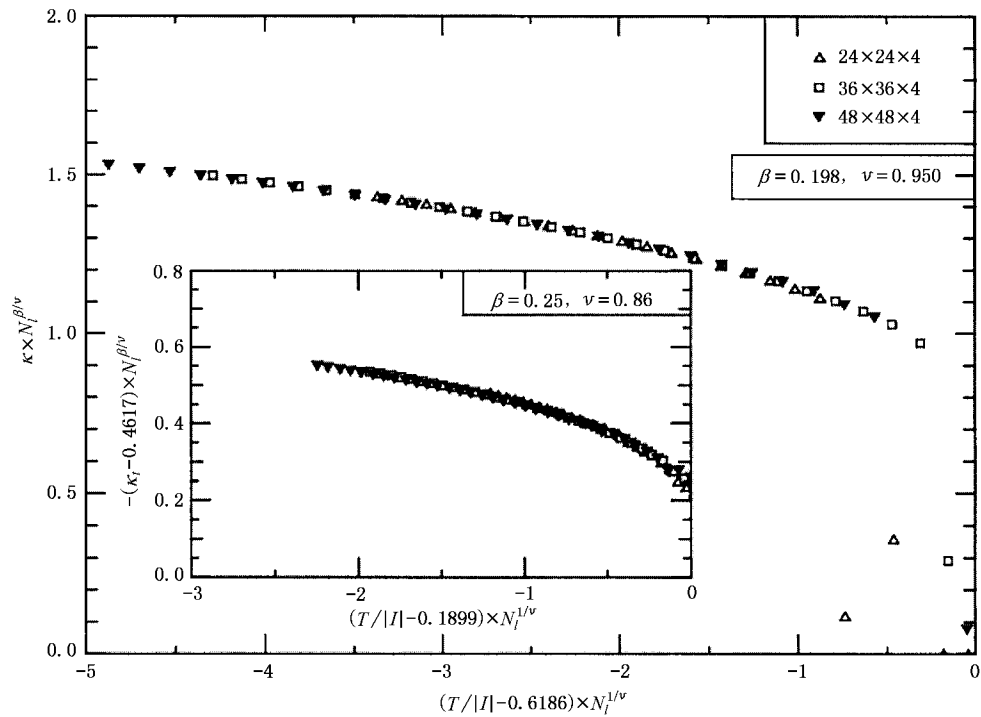


图5 $I = L = -1, J = K = 0.17, P = Q = R = 1$ 时温度与 chirality(κ) 的 finite-size scaling 分析法的结果

散,高温区域的相变是对数发散.对于 $J < 0.14$ 时,系统比热所对应的相变是一个二维系统的 chirality 相变. $J > 0.26$ 时,系统比热所对应的相变一个是二

维系统的 chirality 相变,另一个是 KT 相变.
2 层及三明治式的层状结构(3 层和 4 层)磁性材料模型,其系统的交换常数在一定范围内有两个

不同的二维系统 chirality 相变 ,低温区域的相变是幂级数发散 ,高温区域的相变是对数发散 .临界系数见表 1.

表 1 2 层、3 层和 4 层模型的临界系数					
	2 层 ^[3]		3 层 ^[15]		4 层
	T_{cl}	T_{cu}	T_{cl}	T_{cu}	T_{cl} T_{cu}
α	0.29(9)	$\propto \log$	0.25(5)	$\propto \log$	0.29(7) $\propto \log$
β	0.25(3)	0.125(5)	0.24(5)	0.17(5)	0.25(2) 0.19(5)
ν	0.93(8)	1.09(9)	0.87(7)	0.98(4)	0.85(4) 1.00(4)

由表 1 可见 ,临界系数 β 在低温区域的幂级数发散系数与层数的增加无关 ,而高温区域的对数发散临界系数 β 随层数的增加而增加 .

5. 结 论

采用 Monte-Carlo 方法对三角格子上超薄膜层状磁性材料 XY 模型的内部能量、比热、chirality 等热力学量进行了详细计算 .并使用 finite-size scaling 分析法精确地计算了临界系数 ,对临界现象的性质进行了讨论 .研究发现在层状超薄膜磁性材料 XY 模型内 ,交换常数在一定范围内有两个不同的二维系统的 chirality 相变 .发现低温区域的相变是幂级数发散 ,其发散系数与层数的增加无关 ,高温区域的相变是对数发散 ,其发散系数随层数的增加而增加 .

[1] Allan G A 1970 *Phys. Rev. B* **1** 352

[2] Capehart T W and Fisher M E 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5021

[3] Parry A O and Evans R 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 2175

[4] Binder K , Landau D P and Ferrenberg A M 1995 *Phys. Rev. E* **51** 2823

[5] Hu X and Kawazoe Y 1995 *Phys. Rev. B* **51** 311

[6] Fulghum D M and Camley R E 1995 *Phys. Rev. B* **52** 13436

[7] Jang H and Grimson M J 1997 *Phys. Rev. B* **55** 12556

[8] Ni J and Gu B L 2000 *Chin. Phys.* **9** 469

[9] Binder K 1981 *Z. Phys. B* **43** 119

[10] Horiguchi T , Wang Y and Honda Y 1998 *Physica A* **260** 131

[11] Wang Y , Fukui Y , Quartu R and Horiguchi T 2000 *Physica A* **275** 450

[12] Horiguchi T , Loison D , Diep H T and Nagai O 1994 *Physica A* **206** 508

[13] Kosterlitz J M and Thouless D J 1973 *J. Phys. C* **6** 1181

[14] Miyashita S and Shiba H 1984 *J. Phys. Soc. Japan* **53** 1145

[15] Challa M S S , Landau D P and Binder K 1986 *Phys. Rev. B* **34** 1841

[16] Wang Y and Horiguchi T 2000 *Phys. Lett. A* **269** 55

Phase transitions of XY model in ultra-thin magnetic film with a triangular lattice^{*}

Wang Yi¹⁾ Han Ru-Qi¹⁾ Liu Xiao-Yan¹⁾ Horiguchi Tsuyoshi²⁾

¹⁾(*Institute of Microelectronics , Peking University , Beijing 100871 , China*)

²⁾(*Department of Computer and Mathematical Sciences , GSIS , Tohoku University 04 , Sendai 980-8579 , Japan*)

(Received 26 May 2002 ; revised manuscript received 18 November 2002)

Abstract

Phase transitions and critical phenomena have been clarified for an XY model on the triangular lattice of ultra-thin magnetic films . We have calculated the thermodynamic quantities such as the internal energy , the specific heat , the chirality and so on by using Monte-Carlo simulations . The critical behaviours have been clarified by using finite-size scaling analyses . We have found a new critical behaviour due to a steep increase of the chirality as a function of temperature for the XY model on a layered triangular lattice with antiferromagnetic layers and ferromagnetic layers in some range of interaction parameters , besides the Kosterlize-Thouless transition and the usual chirality transition . In the new chirality transition , the value of a critical exponent has not been observed over any thickness dependence of this value as far as the layered systems are concerned . In the other chirality transition , the value of a critical exponent has been observed over the thickness .

Keywords : layered XY model , critical phenomena , Monte-Carlo simulation , thin magnetic film

PACC : 7510H , 0570J , 7115Q , 7540C

^{*} Project supported by the Foundation from the Ministry of Education of China for the Returned Scholars .